

## ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКОГО СВЯЗУЮЩЕГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Потяженко И.А., Телицына Н.Е., Бондаренко Е.С.

Национальный технический университет Украины «КПИ», natashakxtp@mail.ru

В производстве светотехнических изделий широкое применение находят порошкообразные материалы, предназначенные для образования люминофорных и эмиссионных покрытий, вакуум-плотных швов, геттеров, резисторов и других деталей источников света. Обычно эти материалы перерабатывают в виде паст и суспензий, необходимым компонентом которых является связующее.

В данном докладе рассмотрен процесс получения неорганического связующего – оксинитрата алюминия – с заданными реологическими свойствами (максимальная адгезия к стеклу), а также нахождение оптимальных технологических условий его получения.

При исследовании процесса применялся метод центрального композиционного рототабельного планирования (ЦКРП).

Согласно априорной информации и кинетическим исследованиям было решено, что существенное влияние на  $y_1$  – выход оксинитрат алюминия, %;  $y_2$  – молекулярное соотношение  $Al_2O_3:N_2O_3$  оказывают такие переменные –  $x_1$  – температура процесса,  $^{\circ}C$ ;  $x_2$  – количество концентрированной азотной кислоты, мл;  $x_3$  – количество гидроксида алюминия, мл;  $x_4$  – время протекания химической реакции, мин.

Области изменения указанных факторов в планируемом эксперименте устанавливались исходя из технологических условий, с учетом возможностей аппаратуры и целей, преследуемых постановкой задачи.

В результате проведения активного эксперимента и статистической обработки экспериментальных данных и после отброса незначимых коэффициентов, получены такие уравнения:

$$y_1 = 2,042 + 0,33 \cdot x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,0583 \cdot x_3 + 0,1586 \cdot x_4 - 0,1875 \cdot x_1 x_2 - 0,1 \cdot x_1 x_3 + 0,0375 \cdot x_2 x_3 - \\ - 0,025 \cdot x_2 x_4 + 0,0625 \cdot x_3 x_4 - 0,0213 \cdot x_1^2 + 0,01636 \cdot x_2^2 + 0,02 \\ y_2 = 80,371 + 1,937 \cdot x_1 - 0,0458 \cdot x_2 + 0,129 \cdot x_3 - 1,445 \cdot x_4 - 1,23 \cdot x_1 x_2 - 0,468 \cdot x_1 x_3 - 0,818 \cdot x_1 x_4 - \\ - 1,243 \cdot x_2 x_3 + 1,4 \cdot x_2 x_4 + 0,49 \cdot x_3 x_4 + 1,379 \cdot x_1^2 + 1,329 \cdot x_2^2 + 1,354 \cdot x_3^2 + 1,616 \cdot x_4^2$$

Так как качество исследуемого объекта оценивается не единственным критерием или показателем качества, а двумя, которые одинаково значимы, то такая постановка задачи приводит к задаче оптимизации целевой функции

$$F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = F(F_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n), F_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n))$$

В качестве целевой функции мы предлагаем использовать обобщенную функцию желательности Харрингтона  $D$  [1].

С обобщенной функцией желательности можно проделывать все вычислительные операции, как и с любым откликом системы, наиболее важно то, что его можно использовать как критерий оптимизации системы при поиске компромиссных решений.

Мультикритериальный поиск допустимых решений в четырехфакторном пространстве  $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$  осуществлен с помощью функции Харрингтона, с итерационным использованием метода Монте-Карло (для многомерного случайного сканирования) [2].

Сгенерировано  $N=15\,000$  случайных равномерно распределенных точек (условий проведения процесса) в диапазоне  $-1 \leq x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \leq +1$  и рассчитано по 15 000 значений критериев качества. Соответственно каждому составу рассчитаны частные функции желательности по формуле [2]:

$$d_i(x_1, x_2 \dots x_n) = e^{-e^{-v}}$$

$$\text{где } v = \frac{-\ln\left(\frac{\ln(\text{good})}{\ln(\text{bad})}\right) \cdot y_{\min_i} + \ln(-\ln(\text{bad})) \cdot y_{\max_i} - \ln(-\ln(\text{bad})) \cdot y_{\min_i}}{y_{\min_i} - y_{\max_i}} + \frac{\ln\left(\frac{\ln(\text{good})}{\ln(\text{bad})}\right)}{y_{\min_i} - y_{\max_i}} \cdot y_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Ограничения по каждому показателю качества выбирались исходя из требований к задаче:  $1,5 < y_1 < 3$ ,  $80 < y_2 < 100$ .

В итоге получены 100 составов, удовлетворяющим условию  $D > 0,4$ .

Процедуру выбора из этих точек лучших составов можно продолжить, увеличивая значение критерия  $D$ .

Для лучшей интерпретации результатов следует проанализировать по каждому фактору положение области компромиссных решений посредством полигонов распределений уровней факторов.

Анализируя гистограмму распределений факторов, можно сделать вывод, что при дальнейшей оптимизации состава в более узкой области температуру процесса нужно варьировать на укороченном отрезке от 0,8 до +1; также нужно поступить с количеством гидроксида алюминия и временем проведения реакции, а вот количество концентрированной азотной кислоты можно зафиксировать на нижнем уровне – повышение ее концентрации не ведет к увеличению выхода продукта и оптимальному соотношению  $Al_2O_3:N_2O_3$ . Точка с наибольшим значением  $D$ :  $x_1 = 1$ ;  $x_2 = -1$ ;  $x_3 = 1$ ;  $x_4 = 1$ ,  $y_1 = 2,4$ ,  $y_2 = 87,32$ .

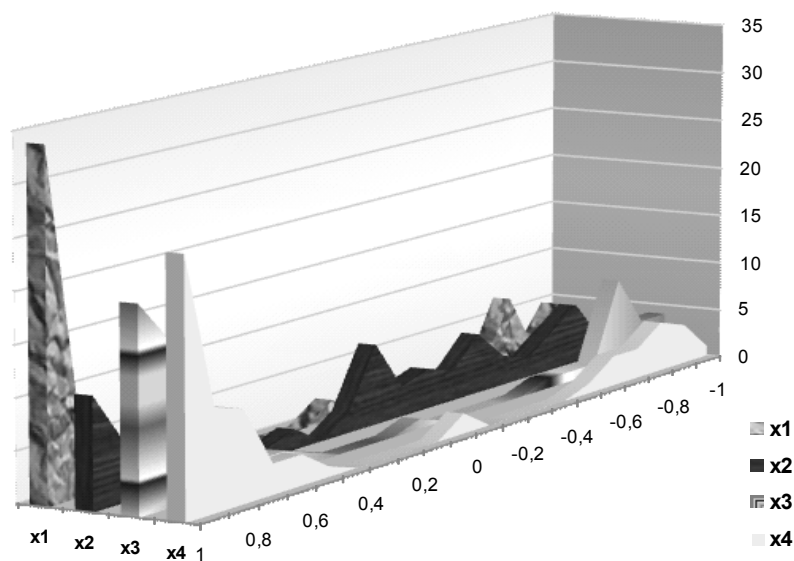


Рис. 1. Полигоны распределений уровней факторов компромиссных составов

Данные, полученные из графика можно использовать в построение следующей зоны оптимума, в которой тоже можно реализовать определенное количество вычислительных данных технологического процесса с последующим отбором оптимальных по функции Харрингтона.

- 1) Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии, 2 изд, М., «Высшая школа», 1985 – 529 с.
- 2) Статюха Г.А., Телицына Н.Е., Яменко А.Б., Суруп И.В. Оптимизация состава сухой строительной смеси с использованием метода Монте-Карло и функции желательности